

2. Absorptionskoeffizient

Elektromagnetisches Feld stört das System aus seinem Gleichgewicht. Gesucht ist die lineare Antwort des Systems auf die Störung.

Startpunkt: Maxwell-Gleichungen

$$\operatorname{div} \vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{\rho_0(\vec{r}, t)}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad \operatorname{div} \vec{B}(\vec{r}, t) = 0$$

$$\operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r}, t) = -\dot{\vec{B}}(\vec{r}, t) \quad \operatorname{rot} \vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_r \mu_0 \vec{j}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c^2} \dot{\vec{E}}(\vec{r}, t)$$

mit der Ladungsträgerdichte ρ_0 ,

Stromdichte $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ (Ohmsches Gesetz)

und der Lichtgeschwindigkeit im Medium

$$c_M = \frac{c}{n} = \frac{c}{\sqrt{\mu_r \epsilon_r \epsilon_0}}$$

$n \hat{=}$ Brechungsindex, ϵ dielektrische Konstante

$\mu \hat{=}$ magnetische Leitfähigkeit (Permeabilität)

In Anwesenheit eines elektrischen Felds

bilden sich mikroskopische Dipole aus

\Rightarrow makroskopische Polarisation $\vec{P}(\vec{r}, t)$

Magnetisches Feld kann zur Magnetisierung $\vec{M}(\vec{r}, t)$ von bestimmten Materialien.

Die Beziehung zwischen Feld, Polarisation und Magnetisierung nennt man Materialgleichung

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{P}(\vec{r}, t)$$

elektrische Flußdichte

(dielektrische Verschiebung)

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\mu_0} (\vec{B}(\vec{r}, t) - \dot{\vec{M}}(\vec{r}, t))$$

magnetische Feldstärke

Für lineare, isotrope und homogene Materialien gilt im Frequenzraum

$$\vec{D}(\omega) = \epsilon(\omega) \epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t)$$

$\epsilon(\omega) \stackrel{!}{=} \text{dielektrische Funktion}$

Daraus folgt für die Polarisation

$$\begin{aligned} \vec{P}(\omega) &= \vec{D}(\vec{r}, t) - \epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) \\ &= \epsilon_0 [\epsilon(\omega) - 1] \vec{E}(\omega) \end{aligned}$$

$$\underline{\vec{P}(\omega)} = \epsilon_0 \chi(\omega) \underline{\vec{E}(\omega)}$$

↑
optische Suszeptibilität

⇓
lineare Antwort des Systems auf eine Störung

Propagation elektromagnetischer Wellen durch ein ungeladenes Medium ($\rho_0 = 0$) und mit $\vec{j} = 0$ wird beschrieben durch die homogene Wellengleichung

$$\square \vec{E}(\vec{r}, t) = 0$$

$$\text{d'Alembert Operator } \square = \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

Vergewisserung der Wellengleichung für ungeladene elektrische Leiter, d.h. $\rho_0 = 0$, $\vec{j}(\vec{r}, t) \neq 0$

=> Telegraphen-Gleichung

$$\square \vec{E}(\vec{r}, t) = \mu_r \mu_0 \sigma \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}(\vec{r}, t)$$

Kurze Herleitung aus Maxwell-Gleichungen

$$\begin{aligned} \rightarrow \rho_0 = 0 &\Rightarrow \operatorname{div} \vec{E} = 0 \Rightarrow \operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r}, t) \\ &= \operatorname{grad}(\operatorname{div} \vec{E}(\vec{r}, t)) - \Delta \vec{E}(\vec{r}, t) \\ &= -\Delta \vec{E}(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\operatorname{rot} \vec{B}(\vec{r}, t) = -\mu_r \mu_0 \underbrace{\sigma \dot{\vec{E}}(\vec{r}, t)}_{\vec{j}(\vec{r}, t)} - \frac{1}{c_m^2} \ddot{\vec{E}}(\vec{r}, t) \\ &\text{Ohmsches Gesetz} \end{aligned}$$

Für Propagation in z-Richtung lautet der Lösungsansatz für die Telegraphengleichung

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}_0 e^{i(kz - \omega t)}$$

Einsetzen in die Telegraphen-Gleichung

$$\left(-k^2 + \frac{1}{c_m^2} \omega^2\right) \vec{E}(z, t) = -i \mu_r \mu_0 \sigma \omega \vec{E}(z, t)$$

$$\Rightarrow k^2 = \frac{1}{c_m^2} \omega^2 + i \mu_r \mu_0 \sigma \omega$$

d.h. im Medium propagierende Wellen mit komplexer Wellenzahl $k(\omega)$

$$(k' + i k'')^2 = \frac{\omega^2}{c^2} (\epsilon' + i \epsilon'')$$

$$k = \frac{\omega}{c} \text{ im Vakuum}$$

↙
Realteil ↖
Imaginärteil

$$k = \frac{\omega}{c} n = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon'} \text{ im Medium}$$

Der Real- und Imaginärteil von $k(\omega)$ können separiert werden

$$1) \quad \epsilon'(\omega) = \frac{c^2}{\omega^2} [k'(\omega)^2 - k''(\omega)^2] \quad \Leftrightarrow \quad \epsilon(\omega) = \frac{c^2}{\omega^2} (k' + i k'')^2$$

$$2) \quad \epsilon''(\omega) = 2 \frac{c^2}{\omega^2} k'(\omega) k''(\omega)$$

Daraus folgt:

$$\text{aus 2)} \quad k''(\omega) = \frac{\omega}{2c n(\omega)} \epsilon''(\omega) \quad \text{mit } n(\omega) = \frac{c}{\omega} k'(\omega)$$

$$\text{aus 1)} \quad k'(\omega) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{1}{2} (\epsilon'(\omega) + |\epsilon(\omega)|)}$$

$$\frac{c}{\omega^2} (k'^2 - k''^2) \quad \sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} = \frac{c^2}{\omega^2} (k'^2 + k''^2) \Rightarrow \frac{c^2}{\omega^2} 2k'^2$$

Damit lässt sich die Lösung der Telegraphengleichung in Form einer gedämpften ebenen Welle aufschreiben

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}_0 e^{i k(\omega) z} e^{-i \omega t}$$

$$= \vec{E}_0 e^{-k''(\omega) z} e^{i (k'(\omega) z - \omega t)}$$

$$k(\omega) = k'(\omega) + i k''(\omega)$$

Das Beer-Lambert Gesetz für die Intensität einer Welle folgt direkt

$$I(\omega, z) = |E(\omega, z)|^2 = I_0 e^{-2 k''(\omega) z} \quad \text{mit}$$

$$= I_0 e^{-\alpha(\omega) z} \quad I_0 = |E_0|^2$$

mit dem Absorptionskoeffizienten $\alpha(\omega) = 2 k''(\omega)$

Es bestimmt die Eindringtiefe des Lichts ins Medium.

Der Realteil der Wellenzahl $k(\omega)$ bestimmt den Brechungsindex $n(\omega)$, der wiederum die Änderung der Lichtgeschwindigkeit im

Medium ausdrückt.

$$c_m(\omega) = \frac{c}{n(\omega)} \quad \text{mit} \quad n(\omega) = \frac{c}{\omega} k'(\omega)$$

Für die meisten Materialien gilt $\epsilon'(\omega) \gg \epsilon''(\omega)$

$$\Rightarrow n(\omega) = \frac{c}{\omega} \underbrace{\frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon'(\omega)}}_{k'} = \sqrt{\epsilon'(\omega)}$$

Der Brechungsindex hat in der Regel nur eine schwache Frequenz-Abhängigkeit

$$\alpha(\omega) = 2 k''(\omega) = 2 \frac{\omega}{2cn(\omega)} \epsilon''(\omega) \\ \approx \frac{\omega}{cn} \epsilon''(\omega)$$

$$\epsilon''(\omega) = \text{Im} \epsilon(\omega) = \text{Im} (\chi(\omega) + 1) = \text{Im} \chi(\omega)$$

$$\boxed{\alpha(\omega) = \frac{\omega}{cn} \text{Im} \chi}$$

$\chi(\omega)$ ist nun die gesuchte Größe.

Für lineare, isotrope und homogene Medien gilt

$$\chi(\omega) = \frac{P(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)} \quad \text{mit der makroskopischen Polarisation}$$

Bestimmung von p_k über
Bloch-Gleichungen

$$P(t) = \sum_k d_{vc} p_k(t) + c.c. \\ \text{Dipolmatrixelement} \quad \text{mikroskop. Polarisation}$$

- makroskopische Polarisation $P(t)$
- Suszeptibilität $\chi(\omega)$
- Absorptionskoeffizient $\alpha(\omega)$

Im Rahmen des p.A-Hamiltonians folgt für χ :

$$\chi(\omega) = \frac{j(\omega)}{\epsilon_0 \omega^2 A(\omega)}$$

$$j = \dot{P}, \quad E = -\dot{A}$$

mit der makroskopischen
Stromdichte

$$\vec{j}(t) = \frac{e}{2m} \sum_{\lambda \lambda'} \sum_{k' k} \langle \lambda k | \vec{p} - e \vec{A}(t) | \lambda' k' \rangle \langle a_{\lambda k}^\dagger a_{\lambda' k'} \rangle + c.c.$$

$$j(\omega) = i\omega P(\omega), \quad E(\omega) = -i\omega A(\omega)$$

$$\left. \begin{array}{l} \Downarrow \\ \frac{P(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)} = \frac{j(\omega)}{i\omega} \frac{1}{\epsilon_0 (-i\omega A)} \\ \Downarrow \\ = \frac{j(\omega)}{\omega^2 A(\omega)} \end{array} \right\}$$

Für ein 2-Band-System mit
 $\lambda, \lambda' \in \{c, v\}$ und mit Dipol-
Approximation, d.h. $k \approx k'$

$$\vec{j}(t) = \frac{e}{2m} \sum_{\mathbf{k}} \left[\langle c\mathbf{k} | \mathbf{p} | v\mathbf{k} \rangle \langle a_{c\mathbf{k}}^\dagger a_{v\mathbf{k}} \rangle + \langle v\mathbf{k} | \mathbf{p} | c\mathbf{k} \rangle \langle a_{v\mathbf{k}}^\dagger a_{c\mathbf{k}} \rangle - e A(t) (\langle a_{c\mathbf{k}}^\dagger a_{c\mathbf{k}} \rangle + \langle a_{v\mathbf{k}}^\dagger a_{v\mathbf{k}} \rangle) + c.c. \right]$$

$$\vec{j}(t) = \frac{2e}{m} \frac{\hbar}{i} \operatorname{Re} \left[\Pi_{\mathbf{k}}^{vc} p_{\mathbf{k}}(t) \right] - \frac{e^2}{m} A(t) n_{\text{tot}}$$

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

mit dem optischen Matrixelement

$$\Pi_{\mathbf{k}}^{vc} = \langle c\mathbf{k} | \nabla | v\mathbf{k} \rangle$$

und der gesamten elektronischen

$$\text{Dichte } n_{\text{tot}} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \langle a_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda \mathbf{k}} \rangle$$

\Rightarrow Optische Suszeptibilität

$$\chi(\omega) \sim -i \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\epsilon_0 \omega^2 A(\omega)} \operatorname{Re} \left[\Pi_{\mathbf{k}}^{vc} p_{\mathbf{k}}(\omega) \right]$$